



TITLE:

対称群を用いたハイゼンベルグモデルの厳密解(基研短期研究計画『層状複合化合物の秩序化と乱れ-層間化合物,超伝導化合物,量子反強磁性体-』,研究会報告)

AUTHOR(S):

斎藤, 理一郎

CITATION:

斎藤, 理一郎. 対称群を用いたハイゼンベルグモデルの厳密解(基研短期研究計画『層状複合化合物の秩序化と乱れ-層間化合物,超伝導化合物,量子反強磁性体-』,研究会報告). 物性研究 1989, 53(3): 289-292

ISSUE DATE:

1989-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93916>

RIGHT:

対称群を用いたハイゼンベルグモデルの厳密解

東大理学部物理 斎藤 理一郎

二次元正方格子反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態の持つ可能な対称性を、置換演算子を用いて議論する。対称性の議論によって基底状態を含む空間を著しく小さくすることが可能になり、有限対角化の次元をさげる有効な方法であることが分かった。

§1. 序

スピンが $1/2$ の unfrustrated (AB sublattice に分けられる) ハイゼンベルグモデルの基底状態は、 $S=0$ の部分空間に存在することが Marshall によって証明されているが、解かれるべきその空間の次元は、有限なスピン数 (N) でも N の増加に伴って加速度的に増加し、計算機による数値的な対角化ではすぐ限界が生じる。実際、現在までに行われた最大の N でも 26 にすぎない。基底状態の性質を調べるだけであれば、基底状態を含む空間をもっと狭め、その空間で対角化を行うのが有効であり、さらに解析的な厳密解を得る足がかりとなろう。これが、我々の目的意識である。

これまでこのスピン系の持つ長距離の物理量は、上述の限界があることから、主に変分関数や他の近似法で調べられてきた。例えば $S=0$ の空間を記述する変分関数として singlet pair $[i, j] = (\alpha_i \beta_j - \beta_i \alpha_j)$ の積 $[i, j][k, l] \cdots [m, n]$ に適当な位相をかけて線形結合をとったスピン関数がよくもちいられる。いわゆる Anderson の Resonating Valence Bonds (RVB) の変分関数である。積 $[i, j][k, l] \cdots [m, n]$ は、構成要素の $[i, j]$ が $S=0$ の関数であるから、合成スピンの大きさに関する規則 ($|S_1 - S_2| < S < S_1 + S_2$, $S = S_1 + S_2$) を用いれば、常に $S=0$ の関数であることがわかる。従って singlet pair の組合せを変えることによって $S=0$ の空間の別な基底を作ることができ、変分空間を構成する。Anderson は最近接のサイトに関して可能な singlet pair をとったが、後にこれでは不十分で、 N の増加に伴って厳密な解からのずれが加速度的に悪くなることが指摘された。これに対し、最近接以外のサイト間にも singlet pair を作って変分空間を広げることがいくつかのグループによってなされ、よりエネルギーの低い状態を得ることが報告されている。特に中川・夏目によって最近得られた変分関数は、 $N=26$ の場合でも、たった3つの変分パラメーターで基底状態に非常に近い状態を実現し注目を集めた。しかし最近接以外のサイトをとると、基底が明らかに overcomplete になり変分関数の成功の説明を困難なものにしている。

最近、小口・北谷は $S=0$ を張る完全な基底として、non crossed diagrams を提案し、斎藤はその完全性を一

般の N に関し証明した。non crossed diagrams とは、(1) まず、円周上に 1 から N (偶数) まで数字を並べ、(2) その 2 つの数字を直線 (弦) で結び、 $N/2$ 本の弦からなるパターンを作るが、(3) この際どの 2 つの弦も交わらないように結ぶことを要請してできるパターンである。最後の要請を課すと可能なパターンの数は、 $S=0$ の次元と一致する。弦で結ばれた 2 つの数字で singlet pair をつくと、パターンから作られたスピン関数は $S=0$ の完全系の基底になっている。この証明に関しては、紙面の制約もあってここでは立ち入らない (論文を J. Phys. Soc. Japan に投稿した)。

本報告はこの完全系の基底を用いて、有限対角化を行うのであるが、さらにハミルトニアンに対称性を用いて基底状態を含む空間を $S=0$ の空間の一部に限定し次元を下げる方法を紹介する。その対称性として置換の対称性を考えれば有効であるというのが以下の主張点である。

§2. 置換演算子による方法

N (偶数) 個のスピン $1/2$ 、unfrustrated ハイゼンベルグモデルのハミルトニアン、

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i \cdot S_j, \quad J > 0, \quad (1)$$

を考える。和は最近接サイトの組についてとる。スピンの内積 $S_i \cdot S_j$ の演算子と i と j を置換する互換 P_{ij} の演算子は、 i と j を添字に持つ $S=1$ 及び $S=0$ のスピン関数に同じように作用し、実際 $S_i \cdot S_j = \frac{1}{2}(P_{ij} - \frac{1}{2})$ の関係がある。この関係を用いて (1) は、

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} P_{ij}. \quad (2)$$

と表わされる。ここでエネルギーの unit を $J/2$ に又 origin を $-\sum_{i,j} J/4$ にとった。図 1 に $N=10$ の場合の例を示す。 $N=10$ の場合は、図 1a の様にユニット・セルと周期境界条件を定めることができる。この関係は図 1b の様にダイアグラムで書くことができ、この場合弦は互換 P_{ij} を表わしている。

この系の基底状態 Φ_0 は、上で述べたように $S=0$ であるから、完全系である non crossed diagrams f_i 's で以下

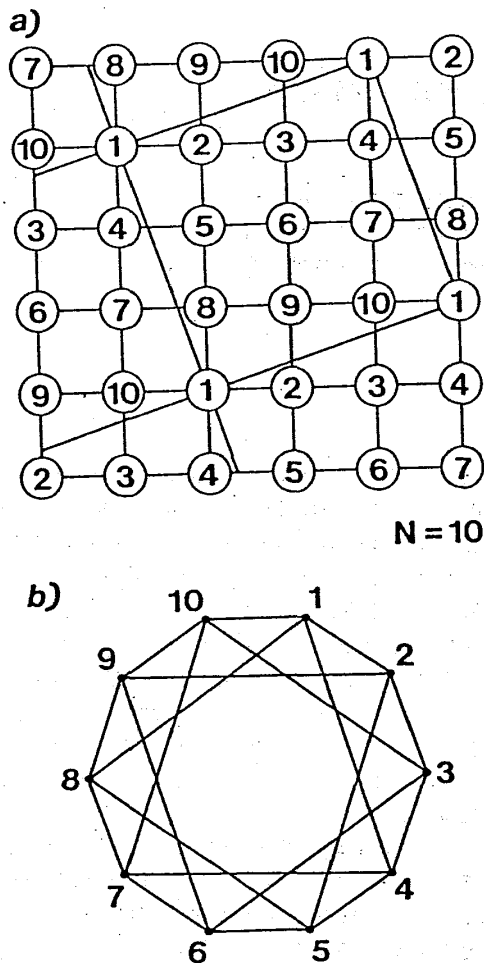


図 1.(a) $N=10$ の場合の周期境界条件、(a) のつながりは (b) の様に表示することができる。

のように一意にかけらる。

$$\Phi_g = \sum_{i=1}^{n_0} b_i f_i, \quad (3)$$

ここで、 b_i は決めるべき係数で、 $n_0 \equiv \frac{N!}{(\frac{N}{2}+1)!\frac{N}{2}!}$ は non crossed diagrams の数であり $S=0$ の次元である。

次に N 個の数字に関する置換 T

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N-1 & N \\ r_1 & r_2 & r_3 & \cdots & r_{N-1} & r_N \end{pmatrix}. \quad (4)$$

を考える。一般に T と S^2 は可換 (朝永振一郎「角運動量とスピン」みすず書房 §84 を参照) であるから、 $T\Phi_g$ は $S=0$ の関数であり f_i を用いて、

$$T\Phi_g = \sum_{j=1}^{n_0} b_j T f_j = \sum_{i,j=1}^{n_0} b_j T_{ji} f_i. \quad (5)$$

と表わされる。実際に、一般の T を non crossed diagram に作用すると crossed diagram になるが、分解公式、

$$[a, c][b, d] = [a, b][c, d] + [a, d][b, c]. \quad (6)$$

を繰り返し用いれば、non crossed diagram の和に分解できる。

ここでもし $[T, H] = 0$ なら、 Φ_g と $T\Phi_g$ は同時固有値を持つが、この系の基底状態は Marshall の条件から縮退していないので (浜田健彦、修士論文 (千葉大、1989 年) 参照)、 $T\Phi_g$ は Φ_g の定数倍になる。この定数値は一般には未知数であるが、 T が A sublattice 上のスピンと B sublattice 上のスピンをすべて交換する置換であれば、Marshall が論文 (Proc. Roy. Soc. (London) A232, (1955) 48) の Appendix A で議論した符号の規則を用いて、

$$T\Phi_g = (-1)^{N/2} \Phi_g. \quad (7)$$

の様に定めることができる。(5) と (6) の右辺は恒等的に等しいので、 f_i の係数は等しく、そこから

$$b_i = (-1)^{N/2} \sum_{j=1}^{n_0} T_{ji} b_j, \quad (i = 1, \dots, n_0). \quad (8)$$

という b_i に関する連立方程式が得られる。ここで再び f_i の線形独立性を用いた。独立な方程式の数が b_i の数だけ

あれば基底状態は上を解くことによって得られるが、実際に独立な方程式の数は n_0 より少なく、 b_i を一意に決めることはできない。しかし、適当に b_i を消去することによって解くべき基底状態の次元 (= 独立な b_i の数) を小さくすることができる。これが次元を小さくする手続きである。この議論を可能な T すべてに関しておこなえばハミルトニアンの持つ可能な対称性を考慮することができ、系統的に次元を減らすことができるのである。

具体的な例を示す前に、 $[T, H] = 0$ なる T をどの様に求めるか簡単にふれる。(2) でかかれたハミルトニアンのある互換 P_{ij} と (4) の T には、

$$T P_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N-1 & N \\ r_1 & r_2 & r_3 & \cdots & r_{N-1} & r_N \end{pmatrix} P_{ij} = P_{r_i, r_j} T. \quad (9)$$

なる関係がある。もし P_{r_i, r_j} がハミルトニアンの別の互換であり、そのような対応関係がすべての P_{ij} に関し一対一であれば $[T, H] = 0$ になる。一般の T は $N!$ 個あるから、このような T の探索は大変そうであるが、プログラムのアルゴリズムに工夫をすれば、短かい時間にほぼ失敗なく探索でき、計算時間は N が増加してもゆっくりしか増加しない。その様なプログラムを用いた $N=10$ の結果を次節で示そう。

§. 3 $N=10$ の場合

まず non crossed diagrams f_i であるが、 $N=10$ の場合 $n_0=42$ 個ある。図 2 に可能な f_i を示した。図中括弧内の数字は non crossed diagrams を回転させてできる独立なパターンの数を示していて、合計すると 42 個になる。

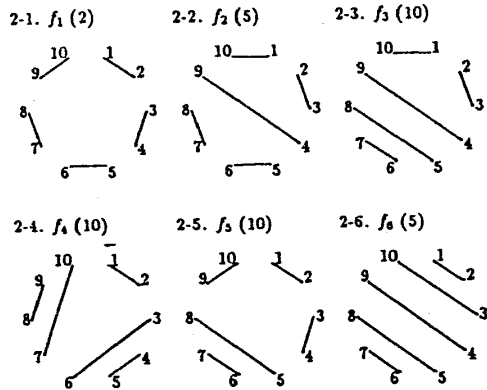


図 2. Non Crossed Diagrams (N=10)。

図 3 に Marshall 条件を満たしかつ $[T, H] = 0$ である、可能な 120 個の置換をやはりダイアグラムで示した。図中、閉曲線は cyclic に移り変わる置換を、また弦は互換を表わして、得られる T はそれらの積である。例えば、図 3-a, 3-l は、それぞれ

$$T_{3-a} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 1 \end{pmatrix},$$

and

$$T_{3-l} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 2 & 1 & 4 & 3 & 10 & 7 & 6 & 9 & 8 & 5 \end{pmatrix},$$

を表わしている。同様に図中の括弧の中の数字は、回転させてできる独立な置換の数を示す。置換の群である対称群は、N の分割数 λ で類を分類できるが、図はその類で分類した。3-a に相当する置換は、回転 (空間では並進) の置換であるが、これを Φ_g に作用すると、図 2 中の non crossed diagrams で回転によって移り変わるものの b_i は皆等しいことがわかる。従って独立な係数を図 2-1 から 2-6 に対応して 6 個の独立な b_i が存在し、それらを b_1 から b_6 の様に定める。つぎに 3-l の置換に関し前節の操作をすると、つぎの 3 つの独立な関係式が得られた。

$$b_2 = b_4, \quad b_3 = b_6, \quad b_1 + b_3 = b_2 + 2b_5 \quad (11)$$

従って我々は、さらに 3 つの b_i (例えば b_3, b_4, b_6) を消去することができ、最終的には、 3×3 の行列を解けばよい。残りの 118 個の T に関しても同様な操作をすることができ、これ以上独立な関係式を得られなかった。その

理由は、T を含む 240 個の置換 (残り 120 個は A から A、B から B に移る置換) が対称群の部分群をなしていて、上記の 2 つの置換がその生成元をなしていることによる。一般に T_1 と T_2 があるとき、その積 $T_1 T_2$ から独立な b_i に関する関係式はできない。

最後に T として H を選び (7) の代わりに、

$$H \Phi_g = E_0 \Phi_g. \quad (12)$$

を用い、前節の方法を使うと以下の関係式を得た。

$$\begin{cases} E_0 = -20 + 20x + 60y \\ E_0 x = -8 + 12x + 24y \\ E_0 y = -6 + 5x + 22y \end{cases}, \quad (13)$$

ここで x, y は、 $x = b_2/b_1, y = b_5/b_1$ である。この式は普通の永年方程式ではない。実際、ハミルトニアンや重な

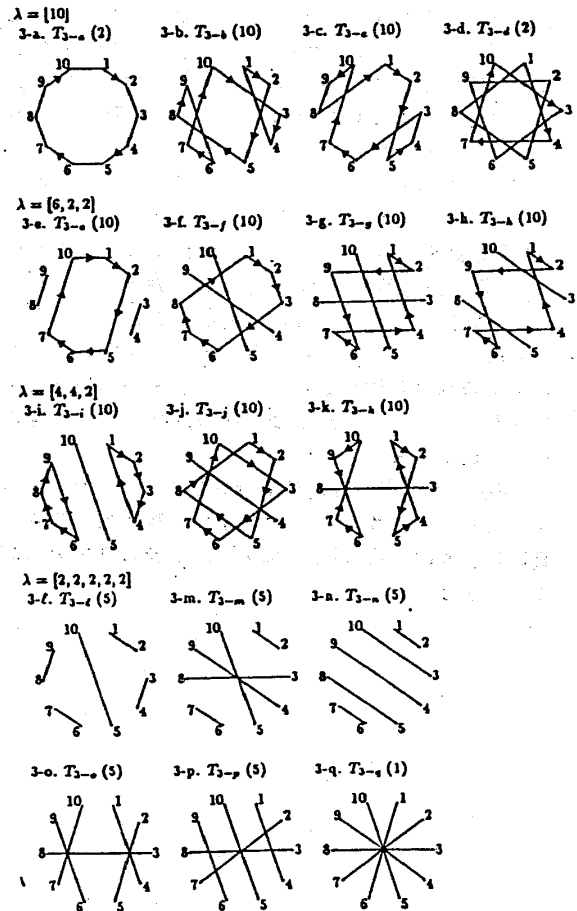


図 3. Marshall の条件を満たすハミルトニアンと可換な置換 (N=10)。

りの行列要素をスピン関数の重なりで計算していない。 x 及び y を消去して、 E_0 に対する方程式を以下の様に得た。

$$E_0^3 - 14E_0^2 - 16E_0 + 320 = 0. \quad (14)$$

これを解くと、一つだけ意味のある実数解が得られる。

$$E_0 = \frac{14}{3} - \frac{4\sqrt{61} \cos\left(\frac{\arctan\left(\frac{14\sqrt{61}}{7}\right)}{3}\right)}{3} = -4.6001\dots, \quad (15)$$

残りの二つの解は虚数解で、物理的な解ではない。得られた解析的な解は、 42×42 の行列を直接対角化した基底状態の数値解と一致した。この固有値は無理数であり、Marshall 条件を用いた方法だけでは、有理数しか得られないことを考えると、Marshall 条件を満たす T だけでは基底状態の対称性を表わし尽くしていないことを示している。つまり無理数を固有値に持つ T が得られることが必要であることを示している。上で示したように H^m は $[H, H^m] = 0$ であるので、この方法に適用する事ができるが、 E_0^m の未知数が新たに発生するので、問題を対角化することと同じことに結局になってしまう。別の対称性で議論されることが望まれる。

最後に一般の N について今の議論を用いるときの注意に触れる。詳しくは論文 (Solid State Commun に掲載予定) を参照されたい。一般の N の場合自明でない対称性 (並進、回転等) を常に得る保証は定かではない。しかし、境界条件を適当なものに設定すると多くの T が得ることは、できそうである。例えば、 $2 \times N/2$ の境界条件は常にその様な対称性を持っている。一般の規則はまだ得ていない。2次元の厳密な解への挑戦として興味のつけない話題である。

謝辞：本研究に有益な議論をして下さった、上村洸先生、夏目雄平先生、小口武彦先生、青木秀夫先生、常行真司氏、島信幸氏、Dr. David Ko、及び研究室の諸氏に感謝します。